Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Blatt 12
Besprechung: 14.07.2017

---

1. 2D-Ising-Modell: (5+9+6=20 Punkte)

Betrachten Sie ein 2D-Ising-Modell aus N Spins ohne äußeres Magnetfeld auf einem Quadratgitter (Koordinationszahl $z = 4$) mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j. \tag{1}$$

(a) Bringen Sie die Zustandssumme auf die Form

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} \left(1 + \sigma_i \sigma_j \tanh \frac{J}{k_B T} \right). \tag{2}$$

Bestimmen Sie die Zahl $P(N)$ für $N \gg 1$.

(b) Überlegen Sie sich, dass man Z aus Gl. (2) wie folgt entwickeln kann:

$$Z = 2^N \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \sum_{m=0}^{\infty} C_{2m}(N) \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^{2m} \tag{3}$$

Das ist die sogenannte Cluster-Entwicklung des Ising-Modells. Was ist die Bedeutung der Zahlen $C_{2m}(N)$? Bestimmen Sie $C_2(N)$, $C_4(N)$ und $C_6(N)$.

(c) Betrachten Sie den Grenzfall hoher Temperaturen $k_B T \gg J$ und berechnen Sie die Wärmekapazität c_V bis zur vierten Ordnung in $J/(k_B T)$.

2. Domänenwände im Ising-Modell: (6+5+7+7=25 Punkte)

(a) Betrachten Sie ein eindimensionales ($D = 1$) Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins. Nehmen Sie an, dass $\sigma_1 = 1$. Diese Randbedingung garantiert, dass bei $T = 0$ alle Spins nach oben zeigen. Die angeregten Zustände niedrigster Energie sind die mit jeweils einer einzelnen Domänenwand, d.h.

$$\sigma_i = \begin{cases} 1, & i \leq k, \\ -1 & i > k, \end{cases} \tag{4}$$

wobei $1 \leq k \leq N-1$. Bestimmen Sie die Anzahl der Zustände und die Energie eines Zustandes mit m Domänenwänden. Berechnen Sie die Zustandssumme des Systems als eine Summe über die Anzahl der Domänenwände.

(b) In einer Dimension beeinflusst die Anwesenheit einer Domänenwand die Spins in beliebig weiter Entfernung. Insbesondere ist $\sigma_N = -1$ in jeder Konfiguration mit einer Domänenwand unabhängig von N. Finden Sie für Konfigurationen mit einer Domänenwand die durchschnittliche Anzahl von Spins $N_\downarrow$, die nach unten zeigen.

(c) Berechnen Sie die Spin-Spin-Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle$ zwischen den Enden des Systems bei endlicher Temperatur als Summe über die Anzahl der Domänenwände. Zeigen Sie, dass der Zerfall für $N \gg 1$ wie $\exp(-N/\xi)$ geht und finden Sie die Korrelationslänge ξ. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Ergebnis aus der Vorlesung.

(d) Betrachten Sie nun das 2D-Ising-Modell aus Aufgabe 1 mit $N \gg 1$ und nehmen Sie an, dass die Spins an allen vier Rändern nach oben zeigen. Das 2D-Ising-Modell kann auch formuliert werden, in dem man Domänen betrachtet. Die einfachste Anregung (Spin-Umklapp) kann als kürzest mögliche Domänenwand (der Länge $\ell = 4$) angesehen werden. Berechnen Sie die durchschnittliche Anzahl von Spins, die nach unten zeigen, wobei nur die kürzeste Domänenwände ($\ell = 4$) betrachtet werden sollen. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Ergebnis der Teilaufgabe 2(b).

5 Bonuspunkte: Nun wollen wir wissen, ob längere Domänenwände bei niedrigen T wichtig werden. Geben Sie eine obere Schranke für den Beitrag der Domänenwände der Länge ℓ zur Zustandssumme an, um diese Frage zu beantworten.

3. 3D-Ising-Modell: Landau-Funktional: (8+9+8=25 Punkte)

Betrachten Sie ein Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter (Gitterkonstante a) mit einer generischen Spin-Spin-Wechselwirkung $J_{ij} = J_{ji}$:

$$\hat{H} = -\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \tag{5}$$

(a) Die Wechselwirkung J_{ij} kann als eine invertierbare $N \times N$-Matrix $\hat{J}$ aufgefasst werden. Entkoppeln Sie die Wechselwirkung mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich-Transformation

$$e^{-\beta \hat{H}} = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp\left[-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} \left(\varphi_i + 2\sqrt{2}\,\sigma_i\right) J_{ij}\, \varphi_j\right]. \tag{6}$$

Führen Sie die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ in der Zustandssumme aus. Entwickeln Sie dann den Exponenten in der Form $\ln(\cosh z) \simeq z^2/2 - z^4/12$ für kleine φ_i.

(b) Transformieren Sie $\varphi_i = \varphi(\vec{r}_i) \to \varphi_{\vec{k}}$ und analog $J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \to J_{\vec{k}}$ in den diskreten Fourierraum. Nehmen Sie an, dass die Elemente J_{ij} nur für Nächster-Nachbar-Paare von Null verschieden sind und entwickeln Sie $J_{\vec{k}}$ bis zur zweiten Ordnung in $ka \ll 1$. Bestimmen Sie Landau-Funktional $\mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]$ in

$$Z \propto \int \left(\prod_{\vec{k}} d\varphi_{\vec{k}}\right) \exp\left(-\beta\, \mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]\right), \tag{7}$$

wobei im φ^4-Term Sie nur den $\vec{k}$-unabhängigen Beitrag in $J_{\vec{k}}$ behalten.

(c) Benutzen Sie nun die kontinuierliche Fourier-Transformation

$$\varphi_{\vec{k}} = \int \frac{d^3 r}{V} \exp\left(-i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \varphi(\vec{r}),$$

um wieder in den Ortsraum zu transformieren und zeigen Sie, dass das Landau-Funktional die folgende Form hat:

$$\mathcal{F}[\varphi(\vec{r})] = \int d^3 r \left[\frac{t}{2}\, \varphi^2(\vec{r}) + b\, \varphi^4(\vec{r}) + \frac{K}{2} \left|\vec{\nabla}\varphi(\vec{r})\right|^2\right]. \tag{8}$$

Geben Sie t, b und K an.